カーネルを用いた非線形次元削減（１３章）

杉山将・本多淳也

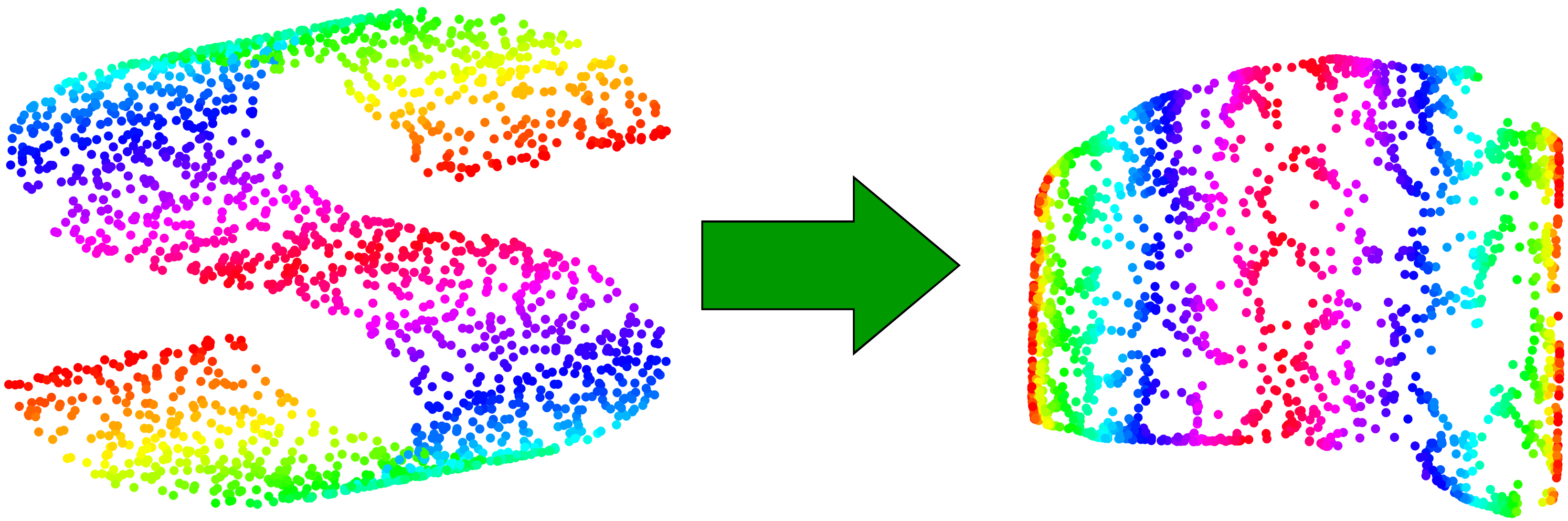
sugi@k.u-tokyo.ac.jp, jhonda@k.u-tokyo.ac.jp

http://www.ms.k.u-tokyo.ac.jp

次元削減

■ 本質的な情報を保持したまま次元を減らしたい！

もとの高次元データ　　　　　　次元削減後のデータ(2d)



■ 1～3次元に減らせば，データを可視化できる.

■ 次元削減の基本的な仮定:

- 手持ちの高次元データはある意味で冗長である

線形次元削減

- (高次元)標本:

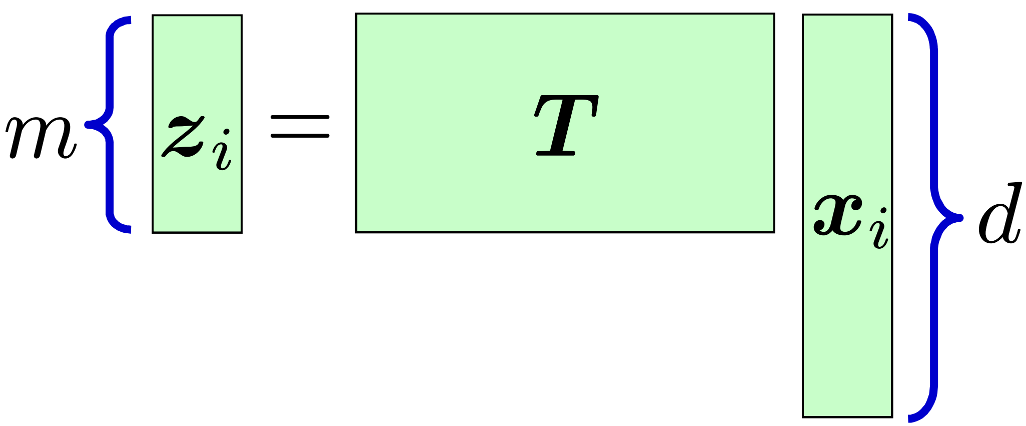
$$\{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^n, \quad \boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^d, \quad d \gg 1$$

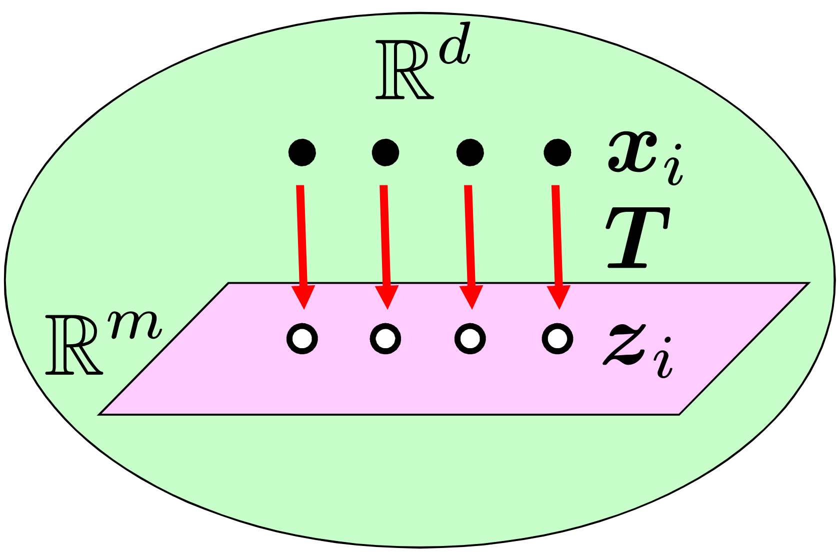
- 埋め込み行列:

$$\boldsymbol{T} \in \mathbb{R}^{m \times d}, \quad 1 \le m \ll d$$

- 埋め込まれた標本

$$\{\boldsymbol{z}_i\}_{i=1}^n, \quad \boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^m$$





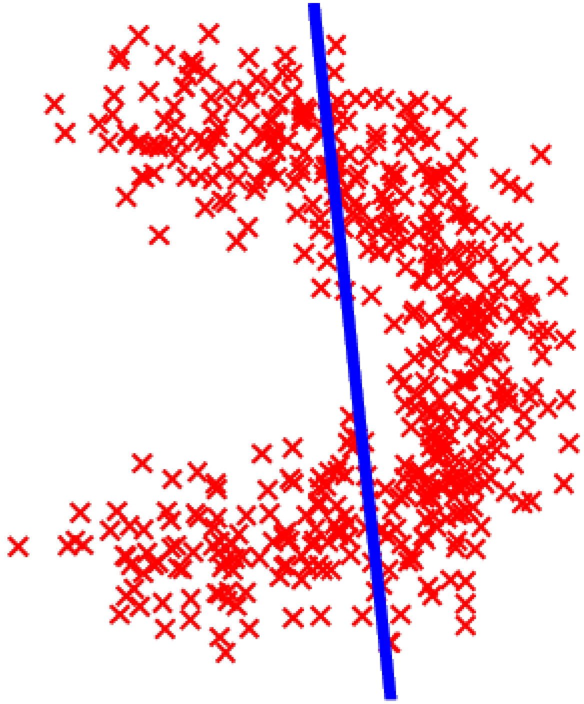
様々な線形次元削減法

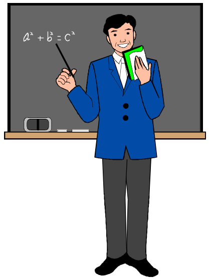
- 教師無し次元削減
  - 主成分分析(PCA):もとのデータを保存
  - 局所性保存射影(LPP):クラスタ構造を保存

- 教師付き次元削減
  - フィッシャー判別分析(FDA):クラス間の分離性を保存

線形次元削減の限界

- データの分布が曲がっているとき，原理的に線形次元削減法ではうまく構造を抽出できない





講義の流れ

1. カーネル主成分分析（13章）
   - A) 双対空間における直接的計算法
   - B) カーネルを用いた間接的計算法
   - C) カーネルについて
2. ラプラス固有写像（13章）

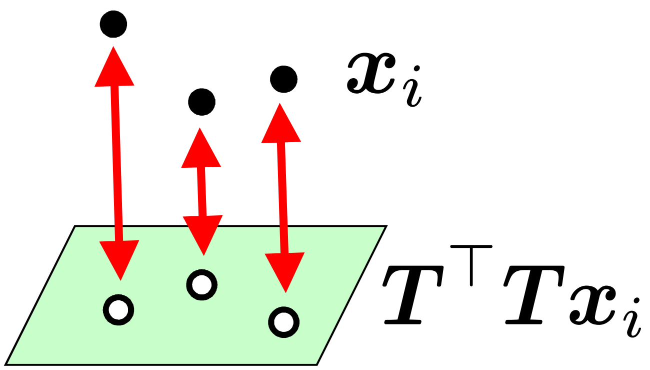
主成分分析

■射影誤差の和を最小にする:

$$\boldsymbol{T}_{\mathrm{PCA}} = \underset{\boldsymbol{T}\in\mathbb{R}^{m\times d}}{\operatorname{argmin}} \left[\sum_{i=1}^{n} \|\boldsymbol{T}^\top \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_i\|^2\right]$$

$$\text{subject to } \boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^\top = \boldsymbol{I}_m$$

（正規直交性の拘束条件をつける）



主成分分析の解の求め方

1. 固有値問題を解く:

$$\boldsymbol{x}_i \longleftarrow \boldsymbol{x}_i - \frac{1}{n}\sum_{i'=1}^{n} \boldsymbol{x}_{i'}$$ 中心化

$$\boldsymbol{C}\boldsymbol{\xi} = \lambda\boldsymbol{\xi}$$

$$\boldsymbol{C} = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_i^\top$$ 標本の散布行列

- 固有値を降順にソート: $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_d$
- 固有ベクトルを正規化: $\|\boldsymbol{\xi}_j\| = 1$

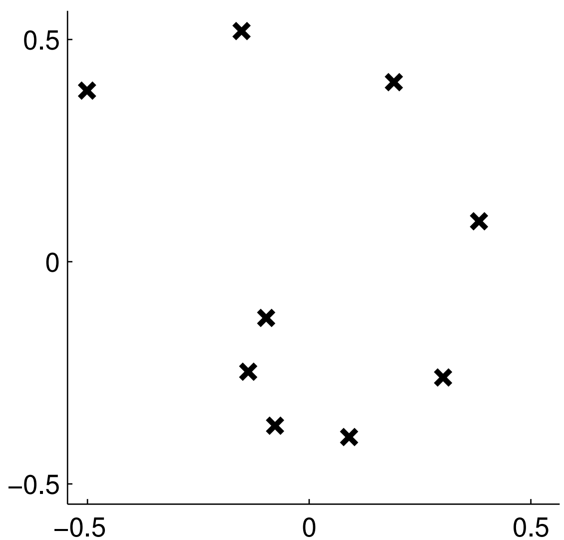
2. 上位 m 個の固有ベクトルを並べる:

$$\boldsymbol{T}_{\mathrm{PCA}} = \boldsymbol{U}(\boldsymbol{\xi}_1, \ldots, \boldsymbol{\xi}_m)^\top$$

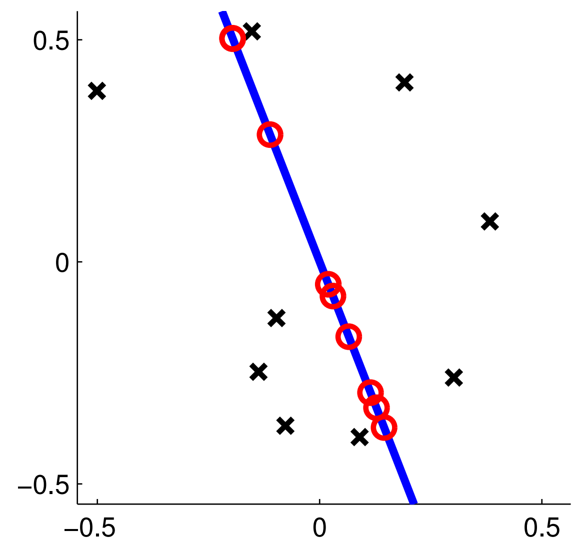
$\boldsymbol{U}$:任意の直交行列

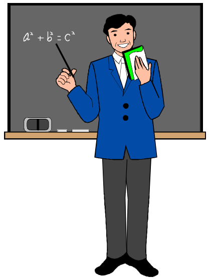
線形次元削減法の問題点

■ データの分布が曲がっていると, うまくいかない



線形の主成分分析



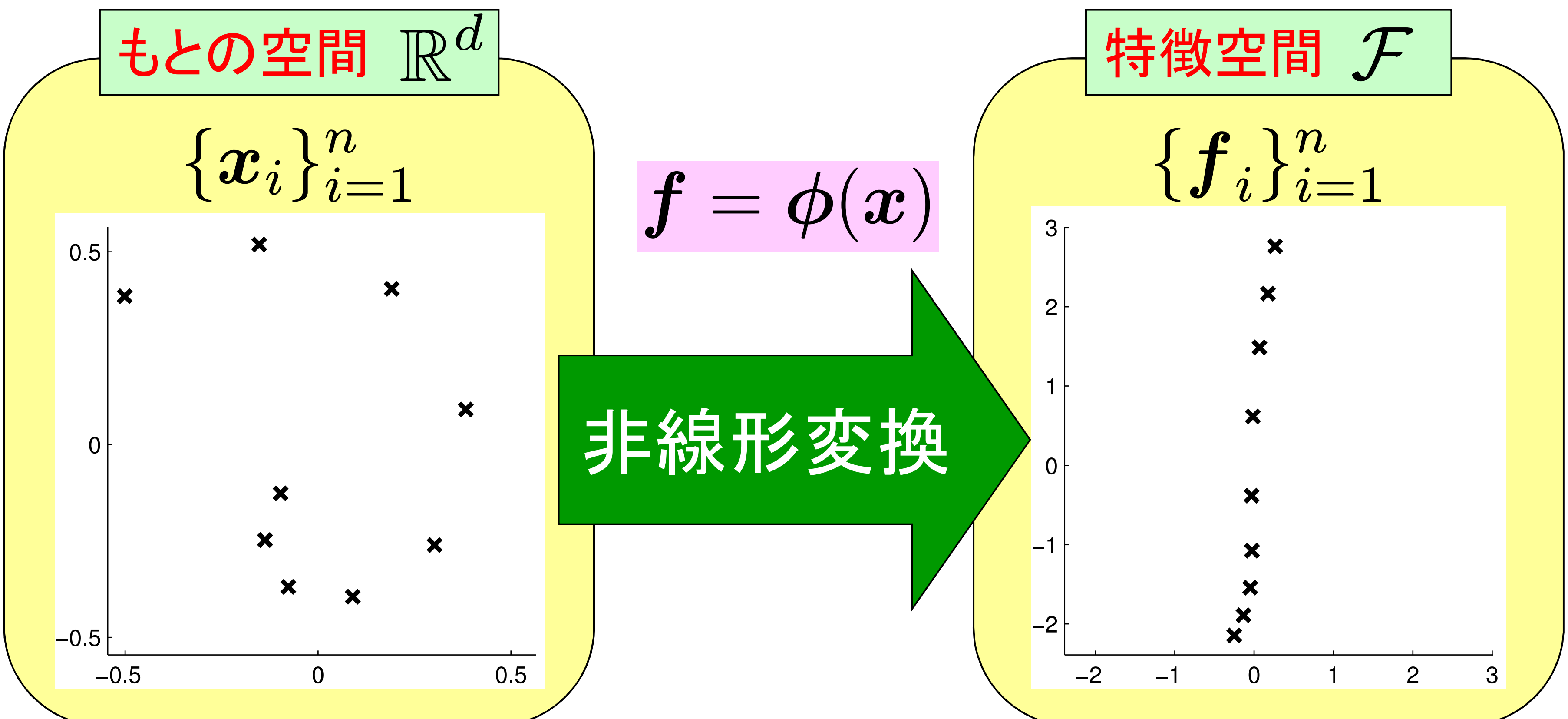


講義の流れ

1. カーネル主成分分析（13章）
   A) 双対空間における直接的計算法
   B) カーネルを用いた間接的計算法
   C) カーネルについて
2. ラプラス固有写像（13章）

線形の手法を非線形にする方法

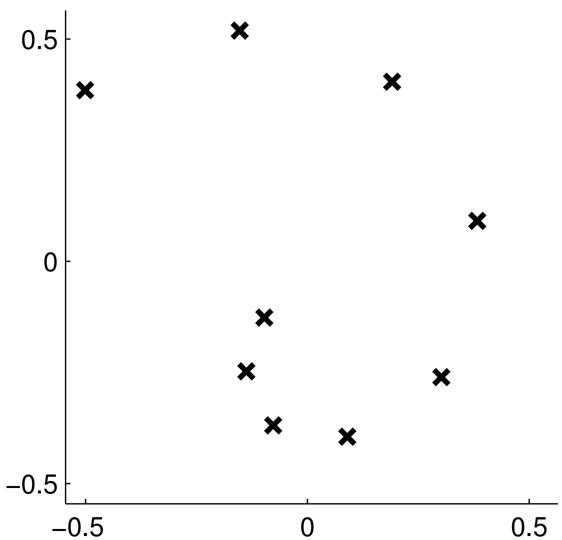
1. もとのデータを特徴空間に**非線形変換**する.
2. 線形次元削減法を特徴空間で実行する.
3. 結果をもとの空間に戻す.



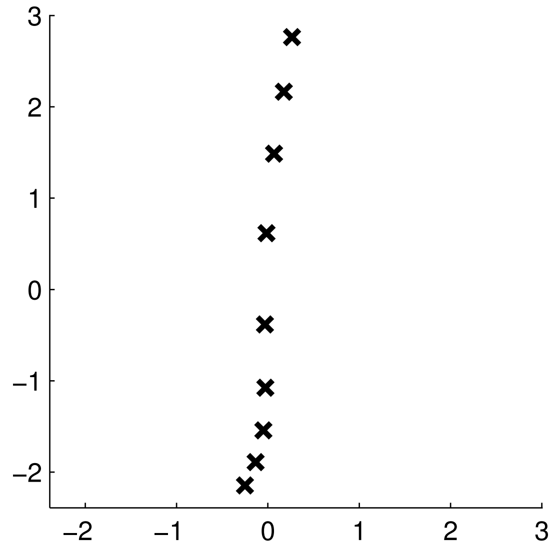
非線形主成分分析の例

■ 特徴空間で主成分分析を行なう.

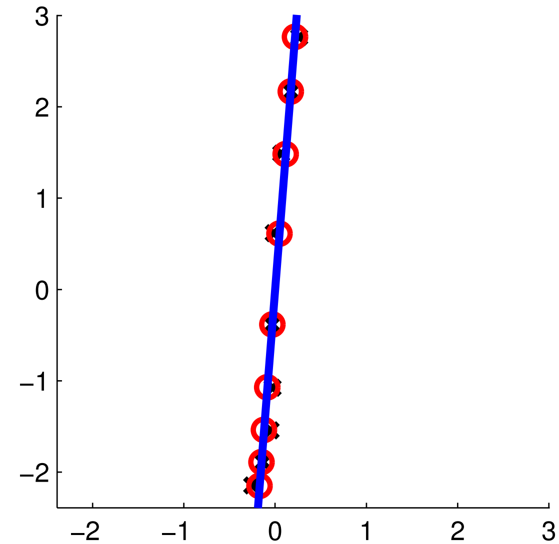
もとの標本



特徴空間内での標本



特徴空間内での
主成分分析



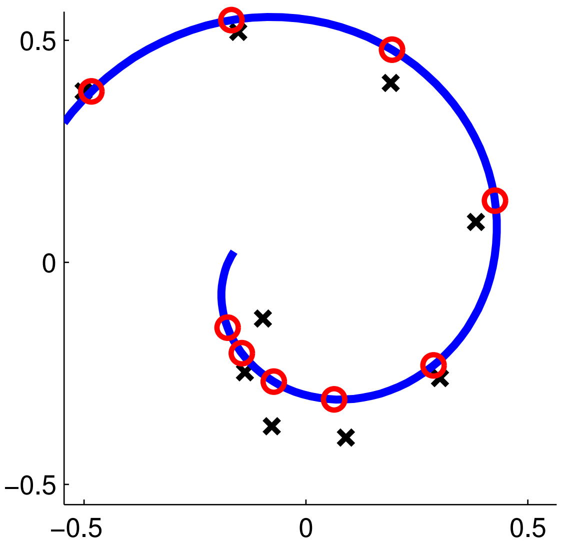
$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \longrightarrow \boldsymbol{f} = \begin{pmatrix} r \\ \theta \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r\cos\theta \\ r\sin\theta \end{pmatrix}$$

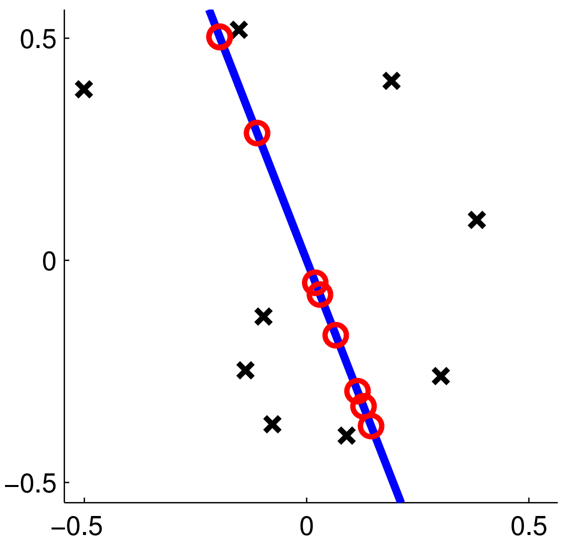
非線形主成分分析の例(続き)

- 結果をもとの空間に戻す.

非線形
主成分分析



線形
主成分分析

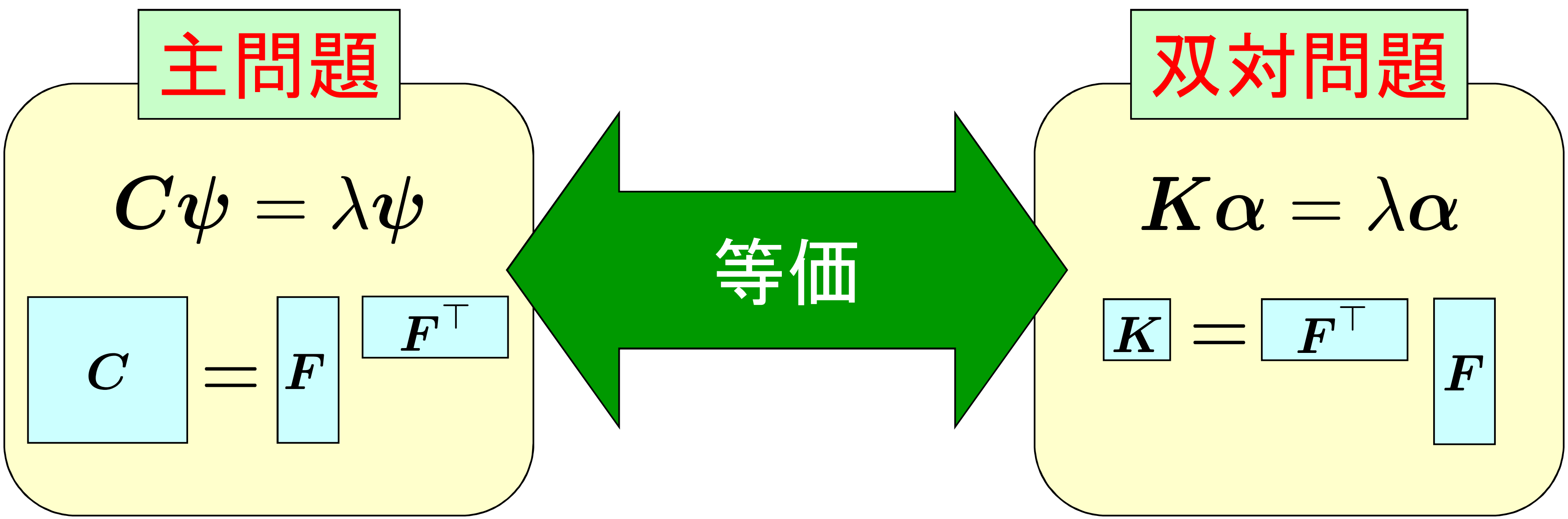


固有値問題

- 固有値問題 $\boldsymbol{C}\psi = \lambda\psi$ の解を用いて，
  固有値問題 $\boldsymbol{K}\boldsymbol{\alpha} = \lambda\boldsymbol{\alpha}$ の解を求められる

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^\top \quad \boldsymbol{K} = \boldsymbol{F}^\top\boldsymbol{F} \quad \boldsymbol{F} = (\boldsymbol{f}_1, \ldots, \boldsymbol{f}_n)$$

- また，その逆も可能である



固有値問題

- 固有方程式 $\boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^\top\psi = \lambda\psi$ の左から $\boldsymbol{F}^\top$をかけると

$$\boldsymbol{F}^\top\boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^\top\psi = \lambda\boldsymbol{F}^\top\psi$$

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^\top$$

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{F}^\top\boldsymbol{F}$$

ここで $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{F}^\top\psi$ とおけば $\boldsymbol{K}\boldsymbol{\alpha} = \lambda\boldsymbol{\alpha}$

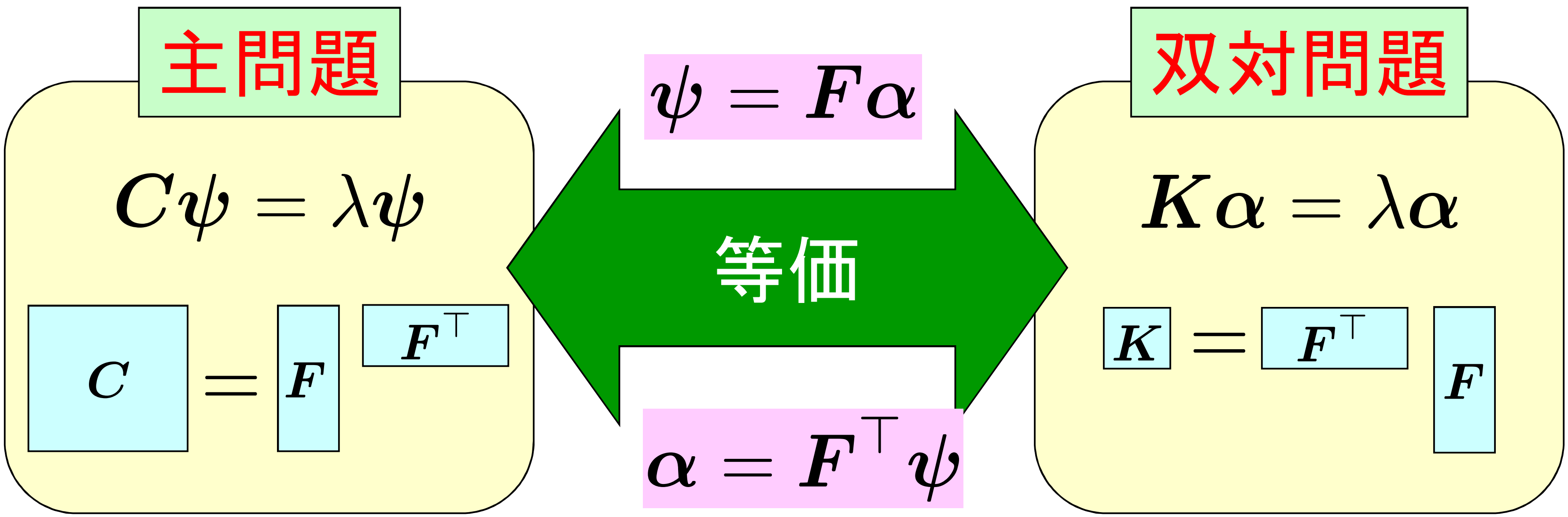
- 固有方程式 $\boldsymbol{F}^\top\boldsymbol{F}\boldsymbol{\alpha} = \lambda\boldsymbol{\alpha}$ の左から $\boldsymbol{F}$ をかけると

$$\boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^\top\boldsymbol{F}\boldsymbol{\alpha} = \lambda\boldsymbol{F}\boldsymbol{\alpha}$$

ここで $\psi = \boldsymbol{F}\boldsymbol{\alpha}$ とおけば $\boldsymbol{C}\psi = \lambda\psi$

特徴空間の次元

- 高次元の特徴空間を用いれば,
  - アルゴリズムの能力は高まる.
  - しかし, 計算時間は増加してしまう.
- $n < \dim(\mathcal{F})$ のとき, 双対問題の方が速く解ける.



$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^\top$ $\quad$ $\boldsymbol{F} = (\boldsymbol{f}_1, \ldots, \boldsymbol{f}_n)$ $\quad$ $\boldsymbol{K} = \boldsymbol{F}^\top\boldsymbol{F}$

数学演習

- 双対問題 $\boldsymbol{K}\boldsymbol{\alpha} = \lambda\boldsymbol{\alpha}$ の正規化された固有ベクトル $\|\boldsymbol{\alpha}\| = 1$ を用いて,
主問題 $\boldsymbol{C}\psi = \lambda\psi$ の正規化された固有ベクトルが

$$\frac{\psi}{\|\psi\|} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\boldsymbol{F}\boldsymbol{\alpha}$$

で与えられることを示せ

- ヒント: $\psi = \boldsymbol{F}\boldsymbol{\alpha}$ と $\boldsymbol{F}^\top \boldsymbol{F}\boldsymbol{\alpha} = \lambda\boldsymbol{\alpha}$ を使う

埋め込み行列の計算

- 特徴空間上での埋め込み行列:

$$\boldsymbol{T}_{\mathrm{PCA}} = (\boldsymbol{\xi}_1, \ldots, \boldsymbol{\xi}_m)^\top$$

$$= \left(\frac{\boldsymbol{\psi}_m}{\|\boldsymbol{\psi}_m\|}, \ldots, \frac{\boldsymbol{\psi}_m}{\|\boldsymbol{\psi}_m\|} \right)^\top$$

$$= \left(\frac{\boldsymbol{\alpha}_1}{\sqrt{\lambda_1}}, \ldots, \frac{\boldsymbol{\alpha}_m}{\sqrt{\lambda_m}} \right)^\top \boldsymbol{F}^\top$$

$$= \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} (\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m)^\top \boldsymbol{F}^\top \qquad \boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_m)$$

$$= \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{F}^\top \qquad \boldsymbol{A} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m)^\top$$

非線形主成分分析(双対)

■特徴の中心化:

$$\boldsymbol{f}_i \longleftarrow \boldsymbol{f}_i - \frac{1}{n}\sum_{i'=1}^{n} \boldsymbol{f}_{i'}$$

$$\boldsymbol{C}\boldsymbol{\psi} = \lambda\boldsymbol{\psi} \quad \boldsymbol{K}\boldsymbol{\alpha} = \lambda\boldsymbol{\alpha}$$

$$\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n \quad \|\boldsymbol{\alpha}_j\| = 1$$

■特徴 $\boldsymbol{f}$ の埋め込み結果:

$$\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}\left(\lambda_1, \ldots, \lambda_m\right)$$

$$\boldsymbol{A} = \left(\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m\right)^\top$$

$$\boldsymbol{\Lambda}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{F}^\top\boldsymbol{f} = \boldsymbol{\Lambda}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{k}$$

$\boldsymbol{I}$:単位行列

$$k_i = \boldsymbol{f}_i^\top\boldsymbol{f}$$

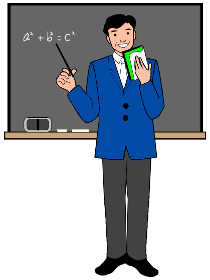
$\mathbf{1}$:全てが1のベクトル・行列

■元のデータ $\{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^n$ を埋め込むときは

$$\boldsymbol{\Lambda}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{K} \qquad \boldsymbol{K} = \boldsymbol{F}^\top\boldsymbol{F}$$

非線形主成分分析:まとめ

- 手持ちの訓練標本を非線形変換し，変換後の標本に対して主成分分析を適用する
  - これにより，もとの標本に対しては非線形な主成分分析を行なったことになる
- 非線形変換後の標本の次元が高い時は計算量が増加する
  - 訓練標本数が次元数より小さいときは，双対問題を解く方が効率が良い



講義の流れ

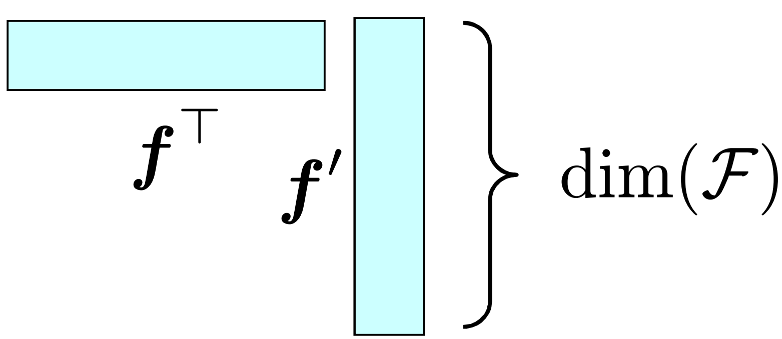
1. カーネル主成分分析（13章）
   - A) 双対空間における直接的計算法
   - B) カーネルを用いた間接的計算法
   - C) カーネルについて
2. ラプラス固有写像（13章）

内積の計算

$$K_{i,i'} = \boldsymbol{f}_i^\top \boldsymbol{f}_{i'} \qquad k_i = \boldsymbol{f}^\top \boldsymbol{f}_i$$

- $\boldsymbol{K}$ と $\boldsymbol{k}$ が与えられれば，双対問題を解くための計算量は $\mathrm{dim}(\mathcal{F})$によらない.
- しかし，$\boldsymbol{K}$ と $\boldsymbol{k}$ の計算は $\mathrm{dim}(\mathcal{F})$に依存する.

$$\boldsymbol{f}^\top \boldsymbol{f}' = \sum_{j=1}^{\mathrm{dim}(\mathcal{F})} f^{(j)} f'^{(j)}$$



カーネル・トリック

$$\boldsymbol{f}^\top \boldsymbol{f}' = \sum_{j=1}^{\dim(\mathcal{F})} f^{(j)} f'^{(j)}$$

- もし上記の積和が閉じた形で書ければ,
  内積の値は一発で計算できる.
- 実用的には, 逆に上記の積和が閉じた形で
  書けるような特徴ベクトル $\boldsymbol{f}$ を考えればよい！
- 任意の半正値カーネル $K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ に対して,

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \boldsymbol{f}^\top \boldsymbol{f}'$$

  を満たす特徴ベクトル $\boldsymbol{f}, \boldsymbol{f}'$ が常に存在する.

$$\forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \quad K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \geq 0$$

数学演習

■多項式カーネル

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = (\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x}')^c \qquad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d \quad c \in \mathbb{N}$$

に対応する特徴ベクトル $\boldsymbol{f}$ を $d = 2, c = 2$ に対して明示的に求めよ

■ヒント: $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} s \\ t \end{pmatrix}$ とおいて $(\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x}')^2$ を明示的に計算

ガウスカーネル

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \exp\left(-\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'\|^2 / c^2\right) \qquad c > 0$$

- 特徴ベクトル $\boldsymbol{f}$ の形は明示的には分からない.
- 気持ちは悪いが，計算する上では何の支障もない.

$$\boldsymbol{f}^\top \boldsymbol{f}' = K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$$

- 暗に定義されている特徴空間は無限次元！

$$\dim(\mathcal{F}) = \infty$$

中心化

- 中心化した特徴ベクトル

$$\overline{\boldsymbol{f}}_i = \boldsymbol{f}_i - \frac{1}{n}\sum_{i'=1}^{n} \boldsymbol{f}_{i'}$$

に対するカーネル行列は

$$\overline{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{H}\boldsymbol{K}\boldsymbol{H}$$

で与えられる

$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n\times n}$

$\boldsymbol{I}$:単位行列

$\mathbf{1}$:全てが1の行列

$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{F}^\top \boldsymbol{F}$

$\overline{\boldsymbol{K}} = \overline{\boldsymbol{F}}^\top \overline{\boldsymbol{F}}$

- 数学演習:これを証明せよ
  - ヒント:中心化を行列で表現する

$\boldsymbol{F} = (\boldsymbol{f}_1, \ldots, \boldsymbol{f}_n)$　$\overline{\boldsymbol{F}} = (\overline{\boldsymbol{f}}_1, \ldots, \overline{\boldsymbol{f}}_n)$

カーネル主成分分析

1. カーネル関数 $K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ を選ぶ.

$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{I}_n - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}_{n\times n}$

$\boldsymbol{I}$:単位行列

$\boldsymbol{1}$:全てが1のベクトル・行列

2. 特徴の中心化を(暗に)行なう:

$$\boldsymbol{K} \longleftarrow \boldsymbol{H}\boldsymbol{K}\boldsymbol{H}$$

$K_{i,j} = K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$

3. (双対の)固有値問題を解く:

$$\boldsymbol{K}\boldsymbol{\alpha} = \lambda\boldsymbol{\alpha}$$

$\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n$

$\|\boldsymbol{\alpha}_i\| = 1$

4. 入力 $\boldsymbol{x}$ の特徴空間内での埋め込み結果:

$$\boldsymbol{\Lambda}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{k}$$

$\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_m)$

$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m)^\top$

$k_i = K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x})$

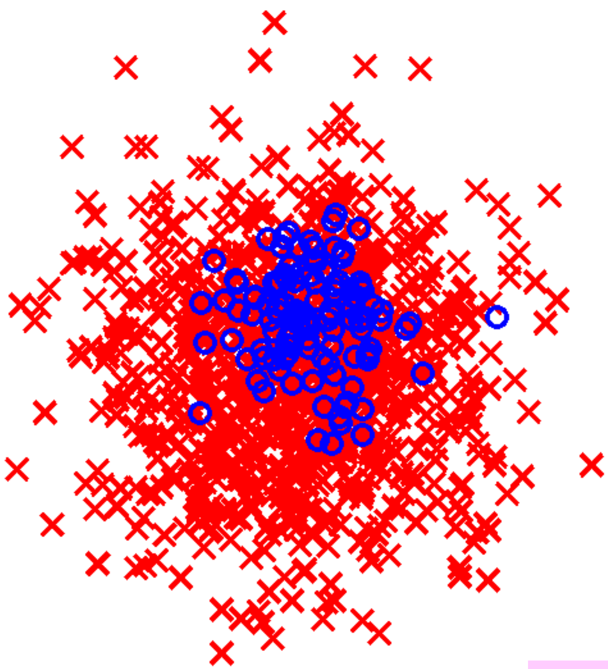
元のデータ $\{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^n$ を埋め込むときは

$$\boldsymbol{\Lambda}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{K}$$

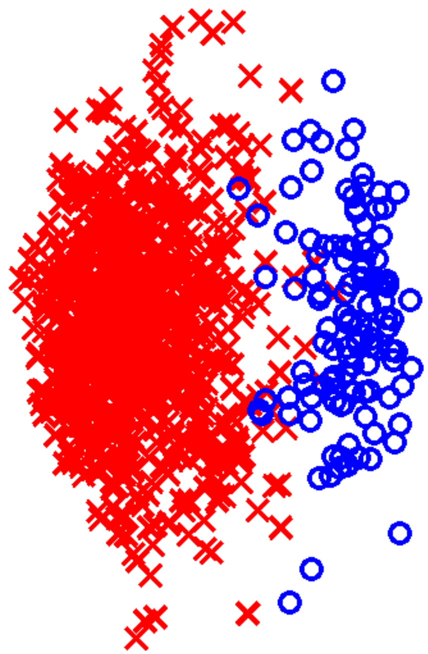
実行例

- ringnorm data（20次元）

線形主成分分析



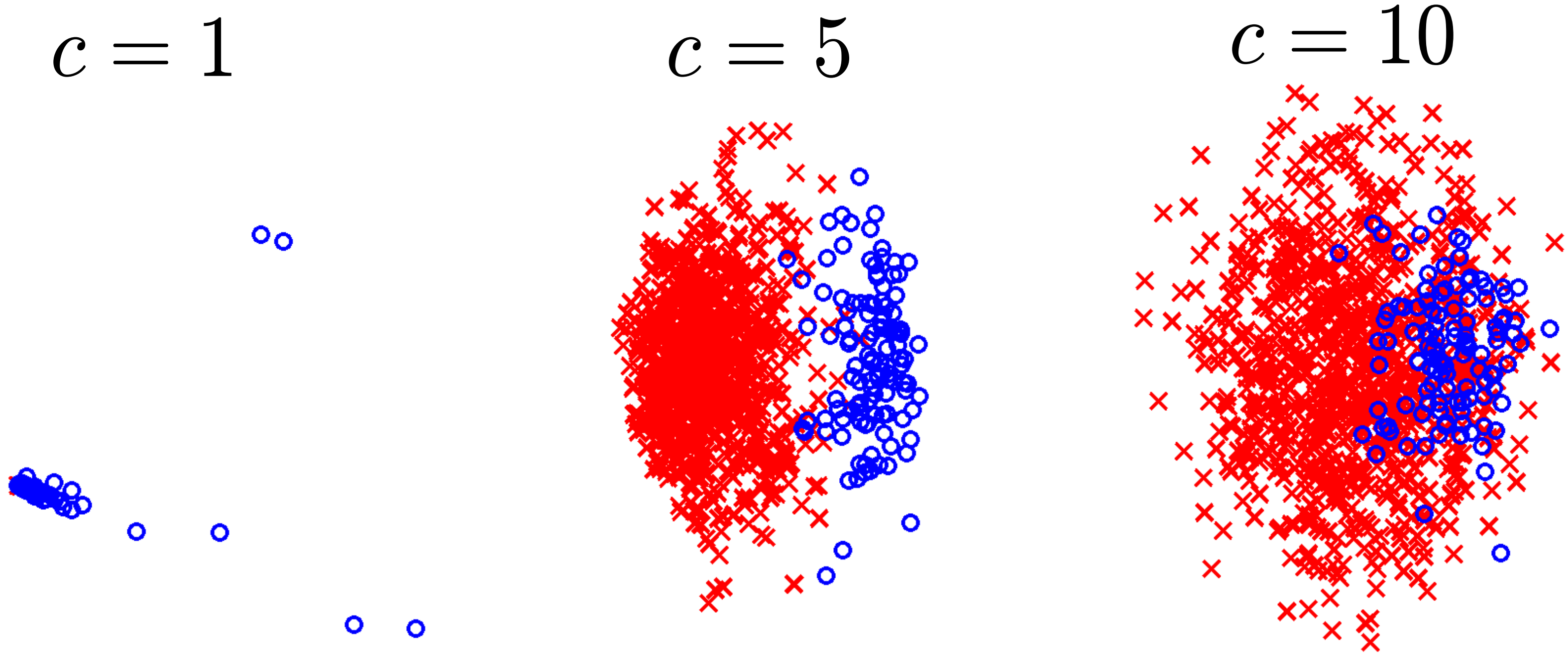
カーネル主成分分析（ガウスカーネル）



$c = 5$

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \exp\left(-\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'\|^2 / c^2\right)$$

カーネル主成分分析の問題点

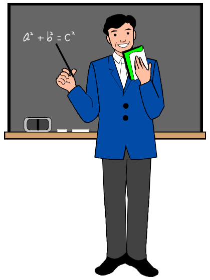


$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \exp\left(-\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'\|^2 / c^2\right)$$

- カーネルの選び方で大きく結果が変わる.
- 特徴空間の次元が高いと元の空間に戻せない.

カーネル主成分分析：まとめ

- 非線形変換を指定するのでなく，非線形変換後の標本の内積をカーネル関数で指定する
- カーネル関数が簡単に計算できる限りは，カーネル主成分分析の計算量は特徴空間の次元数に依存しない
- ガウスカーネルを用いると，特徴空間の次元数は無限大
- カーネルの選び方（＝非線形変換の選び方）が難しい



講義の流れ

1. カーネル主成分分析（13章）
   A) 双対空間における直接的計算法
   B) カーネルを用いた間接的計算法
   C) カーネルについて
2. ラプラス固有写像（13章）

カーネル関数の変形・合成

■ 二つのカーネル関数

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \boldsymbol{f}^\top \boldsymbol{f}' \qquad L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \boldsymbol{g}^\top \boldsymbol{g}'$$

に対して，以下もカーネル関数である：

1. 定数倍：$\alpha K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ $\quad \alpha > 0$
2. 和：$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') + L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$
3. 積：$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$

■ 数学演習：これらを証明せよ

カーネル関数の性質

- ノルム:

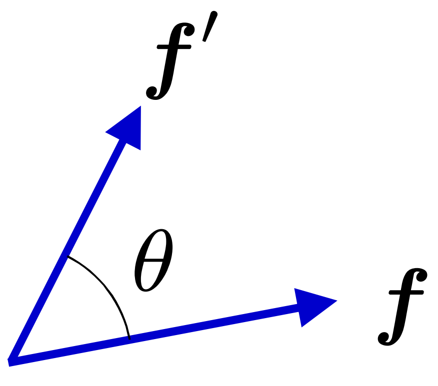
$$\|\boldsymbol{f}\| = \sqrt{K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}$$

- 距離:

$$\|\boldsymbol{f}-\boldsymbol{f}'\|^2 = K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) - 2K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') + K(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}')$$

- 角度: $\boldsymbol{f}^\top \boldsymbol{f}' = \|\boldsymbol{f}\|\|\boldsymbol{f}'\|\cos\theta$ より

$$\cos\theta = \frac{K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}{\sqrt{K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})K(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}')}}$$

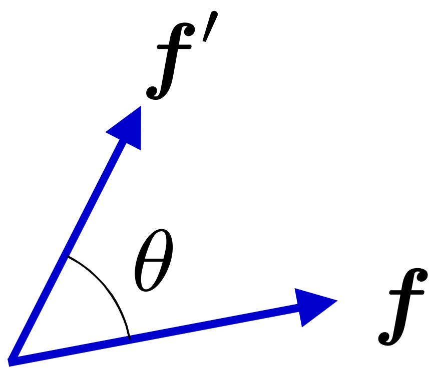


ガウスカーネルの性質

$$K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \exp\left(-\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\|^2/c^2\right) \qquad c>0$$

■ガウスカーネルに対しては,

- $\|\boldsymbol{f}\| = 1$
- $\|\boldsymbol{f}-\boldsymbol{f}'\|^2 = 2 - 2K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$
- $\cos\theta = K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$

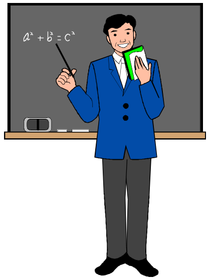


カーネル・トリック：まとめ

$$\boldsymbol{f}^\top \boldsymbol{f}' = K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$$

- 特徴空間での内積をカーネル関数を用いて効率良く計算できる.
- 内積だけで表現できる線形アルゴリズムは，カーネル化できる！
  - 次元削減：PCA, LPP, FDAなど
  - クラスタリング：k-平均法など
  - 関数近似：線形回帰，線形サポートベクトルマシン，フィッシャー線形判別分析など

$$\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x}' \rightarrow K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$$



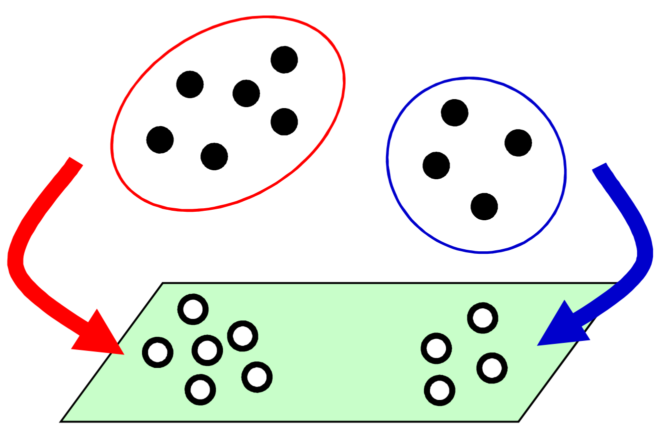
講義の流れ

1. カーネル主成分分析(13章)
2. ラプラス固有写像(13章)

局所性保存射影 (LPP: Locality Preserving Projection)

- 考え方:データの局所的な構造をできるだけ保存したい

→ もとの空間で近くにある標本を近くに埋め込む



類似度行列

■ 類似度行列 $\boldsymbol{W}$:

- $\boldsymbol{x}_i$ と $\boldsymbol{x}_{i'}$ が近い: $W_{i,i'} \to 1$
- $\boldsymbol{x}_i$ と $\boldsymbol{x}_{i'}$ が遠い: $W_{i,i'} \to 0$

$W_{i,i'} = W_{i',i}$

$^\exists \boldsymbol{W}^{-1}$

■ 例:

- 距離ベース: $W_{i,i'} = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{i'}\|^2}{2t^2}\right)$ $t > 0$

$k \in \mathbb{N}$

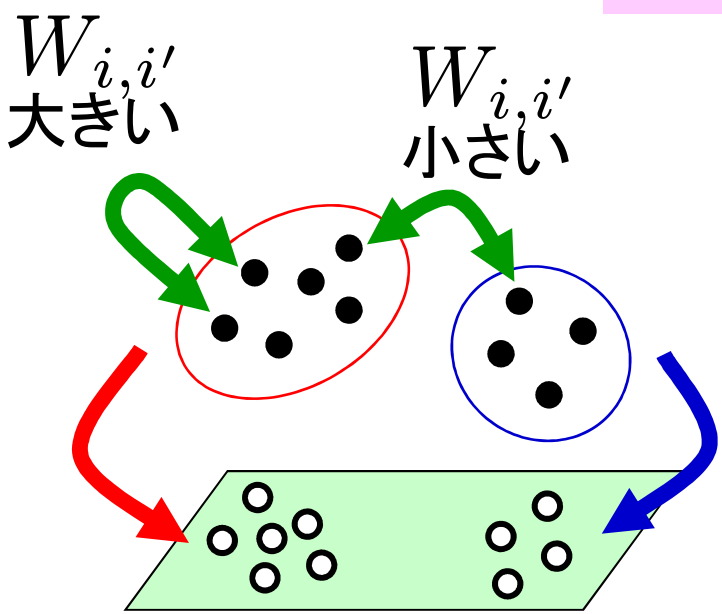
- 近傍ベース: $W_{i,i'} = \begin{cases} 1 & \text{if } \boldsymbol{x}_i \in kNN(\boldsymbol{x}_{i'}) \\ & \quad\quad \text{or } \boldsymbol{x}_{i'} \in kNN(\boldsymbol{x}_i) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$

局所性保存射影の規準

■もとの空間で近くにある標本を近くに埋め込む:

$$\boldsymbol{T}_{\mathrm{LPP}} = \underset{\boldsymbol{T}\in\mathbb{R}^{m\times d}}{\operatorname{argmin}} \sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} \|\boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_{i'}\|^2$$

$$\text{subject to } \boldsymbol{T}\boldsymbol{X}\boldsymbol{D}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{T}^\top = \boldsymbol{I}_m$$



解が縮退しないように
適当な拘束条件をつける

$$\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$$

$$\boldsymbol{D} = \operatorname{diag}\left(\sum_{i'=1}^{n} W_{i,i'}\right)$$

$\boldsymbol{I}$:単位行列

局所性保存射影の解の求め方

$$\boldsymbol{T}_{\mathrm{LPP}} = \underset{\boldsymbol{T}\in\mathbb{R}^{m\times d}}{\mathrm{argmin}}\ \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{T}\boldsymbol{X}\boldsymbol{L}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{T}^\top\right)$$

$$\text{subject to } \boldsymbol{T}\boldsymbol{X}\boldsymbol{D}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{T}^\top = \boldsymbol{I}_m$$

1. 一般化固有値問題を解く:

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W}$$

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{L}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{\xi} = \lambda\boldsymbol{X}\boldsymbol{D}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{\xi}$$

$$\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}\left(\sum_{i'=1}^{n} W_{i,i'}\right)$$

$$\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_d$$

$$\boldsymbol{\xi}_j^\top\boldsymbol{X}\boldsymbol{D}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{\xi}_j = 1$$

$$\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$$

2. 下位 m 個の一般化固有ベクトルを並べる:

$$\boldsymbol{T}_{\mathrm{LPP}} = (\boldsymbol{\xi}_d, \boldsymbol{\xi}_{d-1}, \ldots, \boldsymbol{\xi}_{d-m+1})^\top$$

局所性保存射影の解の求め方

- 局所性保存射影:

$$\boldsymbol{T}_{\mathrm{LPP}} = \underset{\boldsymbol{T} \in \mathbb{R}^{m \times d}}{\mathrm{argmin}}\ \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{T}\boldsymbol{X}\boldsymbol{L}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{T}^\top\right)$$

$$\text{subject to } \boldsymbol{T}\boldsymbol{X}\boldsymbol{D}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{T}^\top = \boldsymbol{I}_m$$

  - 埋め込んだデータ: $\boldsymbol{\Psi}^\top = \boldsymbol{T}_{\mathrm{LPP}}\boldsymbol{X}$
- 暗黙のうちに各標本の次元 d が大きい場合を考える
  - 埋め込み先を直接求める
- 一般化固有値問題 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{\psi} = \gamma\boldsymbol{D}\boldsymbol{\psi}$ の解を小さい順に並べたものが解となる

ラプラス固有写像

- 固有値問題 $L\boldsymbol{\psi} = \gamma D\boldsymbol{\psi}$ の最小固有値 γ_n は0であり，その固有ベクトルは $\mathbf{1}$（定数）.

証明は宿題

$\mathbf{1}$: 全てが1のベクトル

- よって，最小固有値に対応する固有ベクトルは無視する．このとき，埋め込み先は

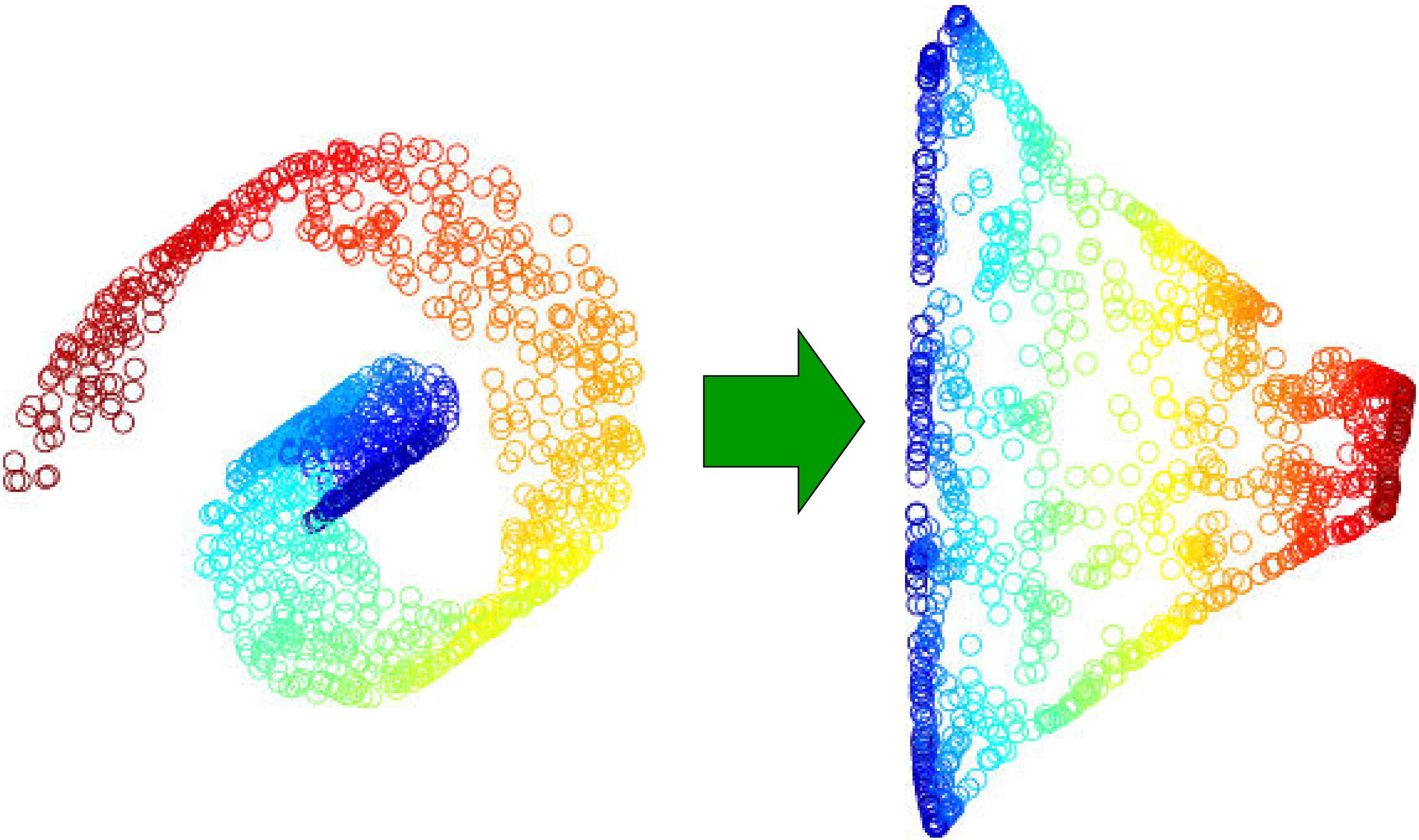
$$\boldsymbol{\Psi}^{\top} = (\boldsymbol{\psi}_{n-1}, \boldsymbol{\psi}_{n-2}, \ldots, \boldsymbol{\psi}_{n-m})^{\top}$$

$$\gamma_1 \geq \cdots \geq \gamma_n \qquad \boldsymbol{\psi}_i^{\top} D \boldsymbol{\psi}_i = 1$$

- 類似度行列 W がスパースの時は L と D もスパースになり，固有値問題が効率良く解ける

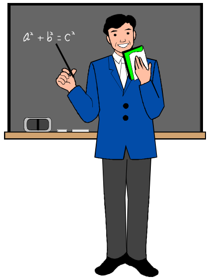
実行例

もとの3次元データ　　　　次元削減後の2次元データ



ラプラス固有写像：まとめ

- 局所性保存射影のカーネル化
- 手持ちの訓練標本を埋め込むときは，固有値問題が単純化できる
- 類似度行列がスパースの時，スパース固有値問題になり効率良く解ける

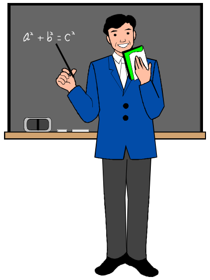


講義の流れ

1. カーネル主成分分析(13章)
2. ラプラス固有写像(13章)

まとめ

- 次元の呪い：高次元データは非常に扱いにくい
- 次元削減：データの特徴を残しつつ次元を削減
- カーネル・トリック：
  - 線形次元削減アルゴリズムを手軽に非線形化
  - 大域的最適解が求まる
  - 回帰，分類，クラスタリングなどにも適用可能
  - カーネルの選択が難しい



次回の予告

- ニューラルネットワークを用いた非線形次元削減

宿題1

- 固有値問題 $\boldsymbol{L}\psi = \gamma \boldsymbol{D}\psi$ の最小固有値γ_n は0，対応する固有ベクトルは$\mathbf{1}$であることを示せ

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W} \qquad \boldsymbol{D} = \mathrm{diag}\left(\sum_{i'=1}^{n} W_{i,i'}\right)$$

$\mathbf{1}$: 全てが1のベクトル

- ヒント:
  - $\boldsymbol{L}$が半正定値行列（全ての固有値が非負），つまり任意の $\boldsymbol{\alpha}$ で $\boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{L}\boldsymbol{\alpha} \geq 0$ であることを示す.
  - $\mathbf{1}$が固有値ゼロに対応する固有ベクトルであることを示す

宿題2

- 最近傍類似度に対するラプラス固有写像を実装せよ

$$W_{i,i'} = \begin{cases} 1 & \text{if } \boldsymbol{x}_i \in kNN(\boldsymbol{x}_{i'}) \\ & \qquad \text{or } \boldsymbol{x}_{i'} \in kNN(\boldsymbol{x}_i) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

```
clear all; rand('state',0); randn('state',0);
n=1000; a=3*pi*rand(n,1);
x=[a.*cos(a) 30*rand(n,1) a.*sin(a)]; z=LapEig(x,2);
figure(1); clf; hold on; view([15 10]);
scatter3(x(:,1),x(:,2),x(:,3),40,a,'o');
figure(2); clf; hold on;
scatter(z(:,2),z(:,1),40,a,'o');
```

LapEig.m
を実装せよ